Materia zeharkatzean ioi azkarrek jasaten duten balaztatze-indarren Z_1^3-arekiko menpekotasuna

J.M. Pitarke
Materia Kondentsatuaren Fisika Saila,
Zientzi Fakultatea, Euskal Herriko Unibertsitatea,

Abstract

A theoretical analysis of the interaction betwenn a swift ion and an electron gas is made, in a many-body perturbation theory aprroach. The term proportional to Z_1^3 in the expression for the stopping power of the medium is derived in the Random Phase Aproximation, applying Feynman diagrams.

Ioi azkarren eta elektroi-gasaren arteko elkarrekintzen azterketa teorikoa egiten da, anitz gorputzen perturbazioen teoriaz baliaturik. Ingurunearen balaztatze-indarraren Z_1^3-arekiko proportzionala den ekarpena lortzen da, zorizko faseen hurbilketan, Feynman-en diagramak erabiliz.

Sarrera

Gauza ezaguna da partikula kargatuek materia zeharkatzean energia galdu egiten dutela, berau inguruneari transferituz. Bestalde, ingurunea osatzen duten atomoen nukleoak elektroiak baino askoz pisutsuagoak direlarik, nukleoek zurgaturiko energia elektroiek zurgaturikoarekin konparaturik oso txikia izanen da, proiektilaren abiadura oso txikia ez denean behinik behin. Beraz, atomoak kitzikatzean galdutako energia kontsideratuko dugu. Diogun, bestalde, lan honetan zehar unitate atomikoak erabiliko ditugula, aurkakorik esaten ez den bitartean. Unitate-sistema honetan $\hbar = m_e = e^2 = 1$ dugu, non $\hbar$ m_e eta e direlakoak hurrenez hurren Planck-en konstante laburtua ($\hbar = h/2\pi$), elektroiaren pausaguneko masa eta elektroiaren karga diren. Bestalde, luzera-unitatea Böhr-en erradioa da, hurrenez hurren $a_0 = h_2/m_e^2 = 0{,}529$ Å, energi unitatea, Hartree delakoa, 1 Hartree $= e^2/a_0 = 27{,}2$ eV, eta abiadura-unitatea, Böhr-en abiadura, $v_0 = \alpha c = 2{,}19 \times 10^8$ cms^{-1}, α eta c, egitura meheko konstantea eta argiaren abiadura izanik.

Ingurunearen balaztatze-indarra, definizioz, higitzen ari den proiektilak luzera-unitateko galdutako energiari deritzo, eta ondoko erara lor dezakegu[1], beraz:

$$-\frac{dE}{dx} = N \sum_n \int d\Omega \left(E_n - E_{no}\right) \sigma_n(\Omega), \quad (1)$$

non N, n_0 , n eta σ_0 direlakoak hurrenez hurren ingurunearen bolumen-unitateko atomo-kopurua, atomoaren hasierako eta bukaerako egoerak adierazten dituzten letrak eta kitzikapen-prozesuari dagokion sekzio eragingkor diferentziala diren.

Sekzio eraginkor diferentzialak kalkulatzeko lehen ordenako perturbazioen teoriaz baliaturik, Bethe-k proiektilaren abiadura handitarako baliagarria den eta proiektilaren kargaren karratuarekiko proportzionala den ondoko emaitza lortu zuen[2]:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi Z_1^2}{v^2} N Z_2 \ln\frac{2v^2}{I} \qquad (v >> 1), \qquad (2)$$

non I delakoa ingurunearen ionizazio-potentziala den:

$$\ln I = \sum_n f_{nn_0} \ln \omega_{nn_0}, \qquad (3)$$

f_{nn0} eta ω_{nn0} , $\sum_n f_{nn0} = 1$ hurrenez hurren batura-legea betetzen duten oszilatzaileen intentsitateak eta maiztasunak izanik. $\mathbf{v}$ delakoa proiektilaren abiadura dugu, eta Z_2 , inguruneko atomoen elektroi-kopurua.

Balaztatze-indarra, bestalde, proiektilak polarizaturiko inguruneak proiektilaren norabide berean eta aurkako norantzan proiektilaren gainean eragiten duen indarra dugu, eta ondoko erara aurki daiteke:

$$-\frac{dE}{dx} = Z_1 \frac{\partial \phi_{ind}}{\partial x}\Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{v}t}, \qquad (4)$$

non ϕ_{ind} delakoa potentzial elektriko induzitua den, hots, polarizaturiko inguruneak sortarazitako potentzial elektrikoa.

Proiektilak sortarazitako potentzial elektriko osoaren eta proiektilaren karga-dentsitatearen arteko erlazioa lineala baldin bada, potentzial elektriko induzituaren Fourier-en transformatua ondoko erara erlazionatzen da karga-dentsitatearen Fourier-en transformatuarekin:

$$\phi_{ind}(\mathbf{q},\omega) = \frac{4\pi\rho_0(\mathbf{q},\omega)}{q^2}\left(\varepsilon_{q,\omega}^{-1} - 1\right), \qquad (5)$$

Poisson-en ekuazioa askatuz berehala froga daitekeenez, $\varepsilon_{k,\omega}$ delakoa ingurunearen erantzunaren berri ematen duen erantzute-funtzio lineala edo funtzio dielektrikoa da. Beraz, (5) delakoa (4)-era eramanez, balaztatze-indarraren ondoko adierazpena aurkituko dugu:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{2Z_1^2}{\pi v^2}\int_0^\infty \frac{dq}{q}\int_0^{qv} d\omega\, \omega\, \mathrm{Im}\left[-\varepsilon_{\mathbf{q},\omega}^{-1}\right]. \qquad (6)$$

Funtzio dielektrikoaren kalkulu mekaniko-kuantiko autobateragarria Lindhard-ek burutu zuen lehenengo aldiz[3] elektroi-gas homogenoaren kasuan eta zorizko faseen hurbilketan (RPA), lehen ordenako perturbazioen teoriaz baliaturik. Lindhard-en funtzio dielektrikoa erabiliz, ondoko erara adieraz daiteke (6) adierazpena, abiadura handiko limitean:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi Z_1^2}{v^2} n \ln\frac{2v^2}{\omega_0} \qquad v >> v_F \qquad (7)$$

hemen, n delakoa bolumen-unitateko elektroi-kopurua dugu, ω_0, elektroi-gasaren plasmoi-maiztasuna, eta v_F, Fermi-ren abiadura.

Lehen ordenako perturbazioen teoriaz baliaturik, beraz, proiektilaren kargaren karratuarekiko proportzionala den balaztatze--indarra aurkituko dugu, materiaren Bethe--ren eredu atomistikoan nahiz elektroi-gas homogenoaren ereduan. Alabaina, Barkas-ek masa bereko π^- eta π^+ mesoien gaineko balaztatze-indarrak ezberdinak zirela frogatu zuen esperimentalki[4], balaztatze-indarra, beraz, proiektilaren kargaren karratuarekiko proportzionala ez zela aurkituz, ordutik hona behin eta berriro frogatu denez [5]. Honi Barkas efektua deritzo, eta balaztatze-indarra, bada, ondoko era honetara idatzi ohi da:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi Z_1^2}{v^2} n\left(L_0 + Z_1 L_1 + \ \ldots\right), \qquad (8)$$

non L_1 delakoak balaztatze-indarraren Z_1^3-arekiko proportzionala den ekarpenaren berri ematen duen. Ondorioz, Barkas efektuaren berri ematen duen gaia da.

Barkas efektua

Barkas efektuaren lehen azterketa teorikoa Ashley-k, Ritchie-k eta Brandt-ek egin zuten[6], denboran zehar aldatzen ari den Coulomb-en indar baten eraginpeko oszilatzaile harmonikoak zurgaturiko energiaren kalkulu klasiko ez-erlatibista burutuz. Ashley-k, Ritchie-k eta Brandt-ek talka-parametro txikitarako $Z_1{}^3$-arekiko proportzionala den ekarpena arbuiagarria zela argudiatu zuten, eta talka-parametro handitarako ondoko emaitza lortu zuten:

$$L_1 \sim \frac{3\pi}{2}\frac{\omega}{v^3}\ln\frac{v}{1.7\omega b_c}, \qquad (9)$$

non ω delakoa oszilatzaile harmonikoaren maiztasuna den, eta b_c , elektroia higitzen deneko espazioaldearen erradioa, hots, talka hurbilak eta talka urrunak banantzen dituen parametroa.

Bestalde, Jackson-ek eta McCarthy-k emaitza berdintsua lortu zuten[7] oszilatzaile harmonikoaren kalkulu klasiko erlatibista eginez, baina oraingoan oszilatzaile harmoniko mekaniko-kuantikoaren erradioaren balioa eman zioten b_c delako parametroari, ondoko emaitza lortuz:

$$L_1 \sim \frac{3\pi}{4}\frac{\omega}{v^3}\ln\frac{2mv^2}{2.89\omega}. \qquad (10)$$

Halaber, Hill-ek eta Merzbacher-ek emaitza berbera lortu zuten[8], oszilatzaile harmonikoaren kalkulu mekaniko-kuantikoa burututz.

Alabaina, Lindhard-ek talka-parametro txikitarako elektroien gaineko potentzial elektrikoa Yukawa-rena zela argudiatuz, $Z_1{}^3$--arekiko proportzionala den talka hurbilengandiko ekarpena talka urrunengandikoa bezain handia zela ondorioztatu zuen eta ekarpen osoa Jackson-McCarthy-renaren bikoitza zela baieztatu zuen[9]; Esbensen-ek, bestalde, Lindhard-ek aurresandako emaitza berdintsua antzeman zuen[10], elektroi-gas homogeno estatikoaren erantzun koadratikoa xeheki aztertu ondoren. Diogun, Jackson-McCarthy-ren emaitzak emaitza esperimentalen berri ematen zuelarik ere, $Z_1{}^4$-arekiko proportzionala den ekarpena[11] Jackson--McCarthy-renaren berdina eta zeinuz aurkakoa izanik, azken hau ere kontutan hartuz Jackson-McCarthy-ren emaitzaren bikoitzak doiarazten duela emaitza esperimentala, Lindhard-ek adierazi zuen bezala[9].

Aldiz, Ritchie-k eta Brandt-ek, Ashley, Ritchie eta Brandt-en jatorrizko teoriak emaitza esperimentalen berri eman zezakeela erakutsi zuten[12], $Z_1{}^3$-arekiko proportzionala den talka hurbilengandiko ekarpena arbuiatuz. Sung-ek eta Ritchie-k, bestalde, elektroi-gas homogenoaren erantzun koadratikoa aztertuz lortu zuten talka urrunengandiko ekarpena Esbensen-ek kalkulaturikoarekin bat bazetorren ere, talka hurbilengandiko ekarpena talka urrunengandikoarekin konparaturik arbuiagarria zela ondorioztatu zuten[13].

Talka hurbilen ekarpenari dagokionez pizturiko ezadostasunak, beraz, ebazteke dirau, eta berau argi dezakeen efektu ez-linealen teoria osatuagoaren beharrean gaude. Proiektilaren eta elektroi-gasaren arteko anitz gorputzen elkarrekintzaren azterketa xehatua egiteko asmoz, bada, lan honetan eremuen teoria kuantikoan garaturiko anitz gorputzen perturbazioen teoriaz baliatzen gara.

Teoria

Izan bedi solido batean zehar **v** abiaduraz pasarazten den Z_1 kargadun ioi biluzia, eta kontsidera dezagun ioiaren eta solidoa osatzen duen elektroi-gasaren arteko elkarrekintza.

Ezaguna da partikula batek t aldiunean **p** momentua izateko duen denbora-unitateko probabilitatea partikularen Green-en funtzioaren **r** aldagaiarekiko Fourier-en transformatuaren moduluaren karratua dela[14], hau da,

$$P_P(t) = |\,G_P(t)\,|^2 = \exp\left[-\,2\mathrm{Im}\left(-\Sigma\right)t\right], \qquad (11)$$

Σ delakoa partikularen autoenergia izanik. Ondorioz, proiektila hasierako egoeratik sakabanatzeko dagoen denbora-unitateko probabilitatea ondokoa dugu:

$$\gamma = 2\,\mathrm{Im}\left(-\Sigma\right), \tag{12}$$

eta ingurunearen balaztatze-indarra lortzeko autoenergiaren zati irudikaria baino ez dugu kalkulatu behar, beraz.

Autoenergiaren $Z_1{}^2$-arekiko proportzionala den ekarpena ondoko erara adieraz daiteke, momentuen adierazpenean:

$$-\,i\,\Sigma_p^{(2)} =$$

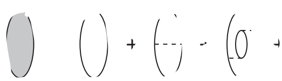
$$= Z_1^2 \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4}\left[iG^0_{p-q}\right]\left[-iV_{\mathrm{q}}\right], \tag{13}$$

non G^0 delakoa partikularen zero ordenako Green-en funtzioa den, eta V_{q}, proiektilaren eta ingurunearen arteko elkarrekintza-potentzial eraginkorra:

$$V_{\mathrm{q}} = \frac{v_{\mathrm{q}}}{1 - v_{\mathrm{q}}\Lambda_{\mathrm{q}}} = v_{\mathrm{q}}\varepsilon_{\mathrm{q}}^{-1}, \tag{14}$$

non V_{q} delakoa Coulomb-en elkarrekintza biluziaren Fourier-en transformatua den, Λ_{q}, berezko polarizazio-diagrama guztien arteko batura, hau da,

$$i\Lambda_{\mathrm{q}} =$$



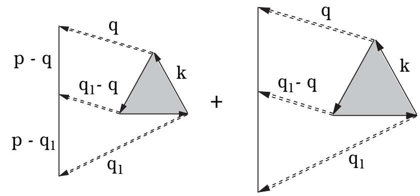
eta ε_{q}, ingurunearen erantzute-funtzio lineala edo funtzio dielektrikoa. (13) delakoa, bada, (12)-ra eramanez, (6) delako adierazpena lortzen da, espero genezakeenez. Bereziki, lehen berezko polarizazio-diagrama soilik kontsideratuz gero (zorizko faseen hurbilketa), $\varepsilon_{\mathrm{q},\omega}$ delakoa Hubbard-en funtzio dielektrikoa dugu[15]:

$$\varepsilon^H_{\mathrm{q},\omega} = 1 + \frac{16\pi}{\mathbf{q}^2}\int_{k<k_F}\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left[\frac{1}{q^2 + 2\mathbf{k}.\mathbf{q} - 2(\omega + i\delta_\omega)} + \frac{1}{q^2 + 2\mathbf{k}.\mathbf{q} + 2(\omega + i\delta_\omega)}\right], \tag{15}$$

zeina ω aldagaiaren balio positiboetarako Lindhard-en funtzio dielektrikoaren berdina den. Hemen $\delta_\omega = \delta\,\sin(\omega)$.

Halaber, autoenergiaren $Z_1{}^3$-arekiko proportzionala den ekarpena ondokoa dugu:

$$-\,i\Sigma_p^{(3)} =$$

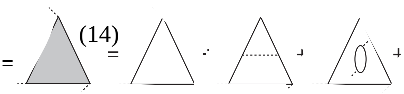


$$= Z_1^3 \int \frac{d^4q_1}{(2\pi)^4}\int\frac{d^4q}{(2\pi)^4}\left[iG^0_{\mathrm{p-q}}\right]\left[iG^0_{\mathrm{p-q_1}}\right]\left[-\mathbf{i}V_{\mathrm{q}}\right]\left[-\mathbf{i}V_{\mathrm{q_1}}\right]$$

$$\left[M_{\mathrm{q,q_1}} + M_{\mathrm{-q,-q_1}}\right], \tag{16}$$

non $M_{\mathrm{q,q1}}$ delako funtzioa ondokoa den:

$$\mathrm{M}_{\mathrm{q,q_1}} =$$



Horrela, bada, (16) delakoa (12)-ra eramanez eta zenbait eragiketa burutuz, balaztatze--indarraren $Z_1{}^3$-arekiko proportzionala den ekarpena ondokoa dela aurkituko dugu:

$$-\frac{dE}{dx}^{(3)} = \frac{2Z_1^3}{\pi^3 v}\int\frac{d^3\mathbf{q}}{\mathrm{q}^2}\int\frac{d^3\mathbf{q}_1}{\mathbf{q}_1^2|\mathbf{q}-\mathbf{q}_1|^2}\int\frac{dq^0}{2\pi}\,q^0 \tag{17}$$

$$\int\frac{dq_1^0}{2\pi}\,\mathrm{Im}\frac{-\varepsilon_q^{-1}\varepsilon_{q_1}^{-1}\varepsilon_{q-q_1}^{-1}\left[M_{q,q_1} + M_{-q,-q_1}\right]}{\left(\mathbf{q}.\mathbf{v} - q^0 + i\eta_1\right)\left(\mathbf{q}_1 . \mathbf{v} - q_1^0 + i\eta_2\right)};$$

Zorizko faseen hurbilketan $\varepsilon_{\mathbf{q},\omega}$ delakoa Hubbard-en funtzio dielektrikoa dugu, eta $M_{\mathrm{q,q1}}$, ondoko hau[16]:

$$M^0_{\mathbf{q},\omega;\mathbf{q}_1,\omega_1} = -4\int_{k<k_F}\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tag{15}$$

$$\left\{\frac{1}{\left[q^2 + 2\mathbf{k}.\mathbf{q} - 2(\omega + i\delta_\omega)\right]\left[q_1^2 + 2\mathbf{k}.\mathbf{q}_1 - 2(\omega_1 + i\delta_\omega)\right]}\right.$$

$$+\frac{1}{\left[q^2+2\mathbf{k}.\mathbf{q}+2(\omega+i\delta_\omega)\right]\left[|\mathbf{q}-\mathbf{q}_1|^2+2\mathbf{k}.(\mathbf{q}-\mathbf{q}_1)+2\left(\omega-\omega_1+i\delta_{\omega-\omega_1}\right)\right]}$$

$$+\frac{1}{\left[q_1^2+2\mathbf{k}.\mathbf{q}_1+2(\omega_1+i\delta_{\omega_1})\right]\left[|\mathbf{q}_1-\mathbf{q}|^2+2\mathbf{k}.(\mathbf{q}_1-\mathbf{q})+2\left(\omega_1-\omega+i\delta_{\omega_1-\omega}\right)\right]}\Bigg\} \quad (18)$$

Balaztatze-indarraren ekarpen hau elektroi-gas estatikoaren nahiz plasmoi-poloaren hurbilketa eginez kalkulatu dugu[17], proiektilaren abiadura handitarako baliagarri diren eta beste ikerlarik[10,13] lorturiko emaitzekin bateragarri diren ondorioak lortuz. Bestalde, talka hurbilengandiko nahiz talka urrunengandiko ekarpenak bereiztu egin ditugu, talka hurbilengandiko ekarpenak plasmoi-poloaren hurbilketan kontsideraturiko elektroi-gasaren batezbesteko abiadurarekiko menpekotasun nabaria erakusten duela aurkituz. Horrela, bada, elektroi-gasaren hasierako abiadura-banaketa zehazki kontsideratzea garrantzi handikoa izan daiteke talka hurbilen eta talka urrunen ekarpenen azterketa egiteko orduan. Azterketa honi ekiten oraintxe ari gatzaizkio.

Eskerrak

Lan hau egiteko Eusko Ikaskuntzaren laguntza jaso da, *Agustin Zumalabe* Ikerketa-Beka baten bidez; baita Eusko Jaurlaritzaren laguntza ere. Egileak, bestalde, R.H. Ritchie eta P.M. Etxenike irakasleek lan hau burutzen izan duten partehartzea eskertzen du.

BIBLIOGRAFIA

1. BONDERUP, E., *Penetration of charged particles through matter* (University of Aarhus, 1978).
2. BETHE, H.A. Ann. Phys. (Leipzig) **5** 325 (1930).
3. LINDHARD, J., Dans. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd. **28** no.8 (1954).
4. BARKAS, W. H., Dyer, N. J. & HECKMAN, H. H. Phys. Rev. Lett. **11** 26 (1963); **11** 138 (E) (1963).
5. ANDERSEN, H. H., SIMONSEN, H. & SORENSEN, H. Nucl. Phys. A **125** 171 (1969): ANDERSEN, L.H., HVELPLUND, P., KNUDSEN, H., Moller, S. P., Pedersen, J. O. P., UGGERHOJ, E., ELSENNER, K. & MORENZONI, E. Phys. Rev. Lett. **62** 1731 (1989).
6. ASHLEY, J. C., RITCHIE, R. H. & BRANDT, W. Phy. Rev. B **5** 2393 (1972); **8** 2402 (1973); **10** 737 (1974).
7. Jackson, J. D. & McCarthy, R. L. Phys. Rev. B **6** 4131 (1972).
8. HILL, K. W. & MERZBACHER, E. Phys. Rev. A **9** 156 (1974).
9. LINDHARD, J.Nucl. Instrum. Methods **132** 1 (1976).
10. ESBENSEN, H. Ph.D. thesis, University of Aarhus, 1977 (unpublished); ESBENSEN, H. and SIGMUND, P. Ann. Phys. **201** 152 (1990).
11. BLOCH, F. Ann. Phys. (Leipzig) **16** 285 (1933).
12. RITCHIE, R. H. & BRANDT, W. Phys. Rev. A **17** 2102 (1978).
13. SUNG, C. C. & RITCHIE, R. H. Phys. Rev. A 28 674 (1983).
14. SCHULTZ, T. D. *Quantum Field Theory and the Many-Body Problem* (Gordon and Breach Science Publishers, Inc., New York, 1964); Fetter, A. L. & Walecka, J. D. *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).
15. HUBBARD, J. Proc. Phys. Soc. (London) **A68** 978 (1955).
16. CENNI, R. & SARACCO, P. Nuclear Phys. **A487** 279 (1988).
17. PITARKE, J. M., RITCHIE, R. H. & ECHENIQUE, P. M. 14th International Conference on Atomic Collisions in Solids, University of Salford, UK, 1991.